

Chemia kwantowa A – laboratorium

Tematy testu z całości materiału w sesji poprawkowej

sobota 22.02.2020, godz. 10, sala 118

Test obejmuje 10 zadań pisemnych i 2 zadania komputerowe

1. Cząstka w pudle
Liczby kwantowe, energie, funkcje falowe i gęstości prawdopodobieństwa dla cząstki w pudle
Wykorzystanie modelu cząstki w pudle do badania cząsteczek chemicznych zawierających układ sprzężonych wiązań podwójnych
2. Oscylator harmoniczny
Liczby kwantowe, energie, funkcje falowe i gęstości prawdopodobieństwa dla oscylatora harmonicznego
Wykorzystanie modelu oscylatora harmonicznego do opisu oscylacji cząsteczek dwuatomowych
3. Rotator sztywny
Liczby kwantowe, energie i funkcje falowe (harmoniki sferyczne) dla rotatora sztywnego
Operator kwadratu momentu pędu, \hat{L}^2 , i rzutu momentu pędu na oś z , \hat{L}_z , w działaniu na harmoniki sferyczne
Wykorzystanie modelu rotatora sztywnego do opisu rotacji cząsteczek dwuatomowych
4. Atom wodoru i jony wodoropodobne
Liczby kwantowe, energie i funkcje falowe (orbitale) dla atomu wodoru i jonów wodoropodobnych
Degeneracja energii dla atomu wodoru i jonów wodoropodobnych
Działanie operatorów \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z na orbitale
Wykresy funkcji falowej i gęstości prawdopodobieństwa wzdłuż osi z
5. Atom wodoru i jony wodoropodobne
Radialna gęstość prawdopodobieństwa – definicja, wykresy, odległość najbardziej prawdopodobna a odległość średnia
Działanie operatorów \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z na orbitale i kombinacje orbitali
6. Atomy wieloelektronowe; metoda Hartree-Focka
Energia jonizacji atomów – definicja energii jonizacji, twierdzenie Koopmansa
Termy i poziomy podstawowe atomów wieloelektronowych
7. Cząsteczki dwuatomowe
Tworzenie orbitali molekularnych z orbitali atomowych; symetrie orbitali molekularnych (σ/π , g/u)
Składniki energii całkowitej dla cząsteczek dwuatomowych
Kolejność energetyczna orbitali molekularnych
Termy cząsteczek dwuatomowych
Rząd wiązania
8. Cząsteczki wieloatomowe
Elementy symetrii cząsteczek wieloatomowych; rozpoznawanie symboli symetrii orbitali molekularnych
Konfiguracje elektronowe i termy cząsteczek wieloatomowych
Poziom HOMO/LUMO, termy stanów wzbudzonych
9. Optymalizacja geometrii
Warunek istnienia ekstremum na hiperpowierzchni energii potencjalnej; określanie charakteru ekstremum
Energia dysocjacji cząsteczki dwuatomowej
10. Przebieg reakcji chemicznych
Warunek istnienia ekstremum na hiperpowierzchni energii potencjalnej; określanie charakteru ekstremum
Charakter ekstremum dla reagentów i stanu przejściowego reakcji chemicznej
Energie barier reakcji chemicznej
11. Zadanie komputerowe: program Maxima
12. Zadanie komputerowe: pakiet Gaussian pod nakładką WebMO